УДК 536.46

ТЕОРИЯ СПОНТАННОЙ ДЕТОНАЦИИ В ГАЗАХ. Ч. 2. МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗРЫВНЫХ ПРОЦЕССОВ

К.О. Сабденов

Томский политехнический университет
E-mail: sabdenov@k21.phtd.tpu.ru

Рассматривается система уравнений газовой динамики горения на основе исходных понятий «нормальная скорость» и «поверхность горения». Турбулентное пламя описывается одним нелинейным параболическим уравнением. Проведены расчеты взрывных процессов в трубах для ряда горючих смесей. Сравнение теоретических данных по длине и времени перехода медленного горения в детонацию с экспериментальными результатами показывает их удовлетворительное согласие.

Изложенные в [1] рассуждения привели к представлению о турбулентном пламени в трубе радиуса a как о хаотически блуждающей поверхности с фрактальной размерностью d_f, где ее элементарный участок движется относительно газа с нормальной скоростью u_n ламинарного пламени. Поверхность горения топологически может быть и многосвязной. Весь газ состоит из двух компонент – свежей смеси с массовой долей C (концентрацией) и продукта горения. Как и C, все термодинамические и гидродинамические параметры потока газа по отношению к гидродинамическому хаосу имеют такой же смысл средних величин, который они имеют в не турбулентных средах по отношению к хаосу молекулярному. Т.е. остающиеся макроскопическими временные и пространственные масштабы турбулентности много меньше аналогичных масштабов рассматриваемых ниже процессов. Для пламени в таком макроскопическом описании можно ввести коэффициент диффузии D [2]:

$$D = 2au_n(1 + B\frac{u'}{u_n})^s, \quad s = d_f - 2, \qquad (1)$$

содержащей турбулентную пульсацию u' скорости потока газа. Превращение исходной свежей смеси в продукт горения описывается выражением для скорости химической реакций Φ

$$\Phi(C) = \frac{u_n}{a}(1 + B\frac{u'}{u_n})^s C(1-C)^2, \qquad (2)$$

приходящим на смену закону Аррениуса. Свободный параметр B зависит от свойств газовой смеси.

Система уравнений газовой динамики горения

Пусть p, ρ, T и u – средние по сечению трубы давление, плотность, температура и скорость газа. В общих случаях без ограничений на скорость движения турбулентного пламени, газодинамические параметры и концентрация свежей смеси C, могут быть найдены решением уравнений [2]

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u\frac{\partial T}{\partial x} = \frac{\gamma - 1}{\gamma}\frac{T}{p}\left(\frac{\partial p}{\partial t} + u\frac{\partial p}{\partial x}\right) + \frac{Q}{c_p}\Phi(C),$$

$$\rho\frac{\partial C}{\partial t} + \rho u\frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}D\rho\frac{\partial C}{\partial x} - \rho\Phi(C),$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho u + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u^2 + p) = -\frac{\lambda}{a}\rho u|u|,$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} = 0, \quad p = \rho R_g T, \; D = 2u_n a\cdot K(u', u_n), \qquad (3)$$

$$\Phi(C) = \frac{u_n}{a}K(u', u_n)\cdot C(1-C)^2, \; K(u', u_n) = (1 + B\frac{u'}{u_n})^s,$$

где Q – тепловой эффект горения горючей газовой смеси с теплоемкостью c_p при постоянном давлении и газовой постоянной R_g; γ – показатель адиабаты; t, x – время и координата вдоль оси трубы.

Уравнения (3) не замкнуты: не хватает связи между пульсацией скорости и скоростью u потока газа. Также система (3) должна быть дополнена связью фрактальной размерности с параметром, характеризующим турбулентное пламя. Таких параметров здесь две: число Рейнольдса Re и отношение u'/u_n. В дальнейшем мы будем пользоваться простейшей формулой замыкания [3] $u' = \sqrt{\lambda}|u|$. Что касается фрактальной размерности поверхности горения, то функциональную зависимость $d_f = d_f(\mathrm{Re}, u'/u_n)$ пока не удается установить.

На ряде примеров покажем непротиворечивость ур. (3) ранее установленным теоретическим и экспериментальным фактам. Известно [4], что с точностью до ошибок эксперимента концентрационные и тепловые пределы ламинарного горения и детонации или совпадают, или мало различаются. В качестве примера в табл. 1 приведены экс-

периментальные данные по концентрационным пределам детонации и нормального распространения пламени ряда газов в смеси с воздухом [4]. Из (3) следует, что эти пределы совпадают. Действительно, если u_n=0, что имеет место за концентрационными пределами, то ур. (3) будут описывать химически инертную среду, где заведомо не может быть ни детонации, ни медленного горения. Таким образом, сформулированная модель горения газов по концентрационным пределам двух предельных режимов – дефлаграции и детонации не противоречит эксперименту (возможность описания детонационного горения показана ниже).

Таблица 1. *Концентрационные пределы детонации и медленного горения для ряда горючих газов в смеси с воздухом*

Горючее	Концентрационный предел детонации (и нормального распространения пламени), %	
	Нижний	Верхний
Этан	2,87 (3,0)	2,57 (2,20)
Пропан	1,98 (1,90)	3,32 (3,10)
Бутан	3,55 (2,25)	12,2 (12,5)
Этилен	7,37 (9,50)	6,18 (8,50)
Пропилен	14,7 (32,0)	10,4 (10,8)

В [5] анализом ур. (3) показано, что в однородной турбулентной среде (u'=const) пламя распространяется со скоростью

$$u_f = u_n (1 + Bu'/u_n)^s, \qquad (4)$$

и что она является собственным значением нелинейной краевой задачи. Последнее обстоятельство является одним из важнейших математических характеристик волн горения [6]. При отсутствии турбулентности скорость пламени в точности равна экспериментально наблюдаемому значению: $u_f=u_n$. Если интенсивность турбулентности высока, то выражение (4) переходит в формулу Вилюнова-Климова. Т.о., используемые представления горения, основанные на понятиях «поверхность горения» и «нормальная скорость пламени» не противоречат известным полуэмпирическим и статистическим подходам в теории турбулентного горения. Более того, если ранее число s в формуле Вилюнова-Климова присутствовало как формальный параметр, то здесь оно имеет явную геометрическую трактовку, указывая на меру сложности поверхности горения.

Расчет перехода медленного горения в детонацию

Переход медленного горения в детонацию быстрогорящих смесей изучался на основе системы (3), в которой первое уравнение переписано в удобной для численного решения форме и всем уравнениям придана дивергентная форма. Переход к безразмерным величинам проводился по следующим масштабным параметрам

$$u_* = u_n M,\ \rho_* = \rho_0,\ p_* = \rho_0 u_n^2,$$
$$t_* = a/u_n,\ x_* = aM,\ M = \sqrt{p_0/\rho_0 u_n^2}.$$

Здесь p_0, ρ_0 – начальные значения давления и плотности газовой смеси. Численно решались уравнения в безразмерных переменных:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{1}{\gamma-1}p + \rho\frac{u^2}{2}\right) +$$
$$+\frac{\partial}{\partial x}u\left(\frac{\gamma}{\gamma-1}p + \rho\frac{u^2}{2}\right) = M_1 K\rho C(1-C)^2,$$
$$\frac{\partial}{\partial t}\rho C + \frac{\partial}{\partial x}\rho u C = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{2K\rho}{M^2}\frac{\partial C}{\partial x}\right) - K\rho C(1-C)^2,$$
$$\frac{\partial}{\partial t}\rho u + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u^2 + p) = -\lambda M \rho u|u|,$$
$$K = (1 + BM\sqrt{\lambda}|u|)^s,\quad \frac{\partial}{\partial t}\rho + \frac{\partial}{\partial x}\rho u = 0, \qquad (5)$$
$$\lambda = 0{,}0032 + \frac{0{,}221}{(\mathrm{Re}\,|u|)^{0{,}237}},\ \mathrm{Re} = \frac{2au_nM}{\nu},\ M_1 = \frac{\rho_0 Q}{p_0}.$$

Выражение для коэффициента сопротивления λ (формула Никурадзе) взято из [7]. Коэффициент кинематической вязкости ν считался постоянным.

Сформулируем начальные условия. При выводе выражений для $\Phi(C)$ (1) и D (2) заведомо предполагается наличие фронта горения. Это означает, что ур. (3) или (5) принципиально не могут описывать стадию воспламенения горючей смеси. Начальной момент горения должен моделироваться методами классической теории горения, изложенной, например, в [6]. Поэтому при решении (5) начальные условия необходимо задавать в виде сформировавшегося фронта пламени.

Потери тепла в стенку трубы в расчетах не учитываются. Начало взрывного горения происходит в центре трубы неограниченной длины. Это эквивалентно зажиганию у закрытой части при адиабатических условиях на жестком торце.

Начальные условия имеют вид:

$$p = 1{,}5,\ C = 0,\ u = 0,\ \rho = 0{,}3,\ \text{для} -\varepsilon < x < +\varepsilon; \qquad (6)$$
$$p = 1,\ C = 1,\ u = 0,\ \rho = 1 - \text{для других } x.$$

Константа ε подбиралась таким образом, чтобы размер области «начального» горения для всех смесей было равным $3a$. Показатель адиабаты и коэффициент кинематической вязкости брались равными 1,4 и $1{,}5\cdot10^{-5}$ м²/с. Радиус трубы $a=1{,}3\cdot10^{-2}$ м.

Система ур. (5, 6) решалась численно по явной 2-го порядка точности по пространственной координате схеме Годунова-Колгана.

Моделирование перехода медленного горения в детонацию проводилось для смесей $4H_2+O_2$, $2H_2+O_2$, H_2+O_2, H_2+2O_2, CH_4+2O_2, C_2H_2+воздух, $2CO+O_2$, по которым имеются наиболее полные экспериментальные данные, включая условия проведения опытов. Все начальные данные соответствуют нормальным условиям.

Сравнение расчетной длины R_D преддетонационного участка и времени t_D перехода медленного горения в детонацию с экспериментальными

данными [8–10] показывает их удовлетворительное согласие (табл. 2). Основные размерные параметры (начальные давление и плотность топливной смеси, тепловой эффект реакции, нормальная скорость пламени и пр.), определяющие R_D и t_D, отвечают условиям проведения экспериментов.

Если параметр B подобран для согласования расчета с экспериментом, то близость значения показателя s к единице легко обосновать. В экспериментальных исследованиях факельного турбулентного горения газовых смесей значение $s \approx 0,7...0,8$ [10]. При сильной турбулентности, имеющей место в период ускорения пламени, фрактальная размерность поверхности горения $s \to 1$. Но предельно допустимое значение $s=1$ (т.е. $d_f=3$) реализуется лишь при $Re=\infty$. Поэтому здесь и далее $s=0,8...0,9$.

Таблица 2 *Сравнение теории с экспериментом по определению протяженности преддетонационного участка $R_D/2a$ и времени перехода t_D*

Смесь	$B(s)$	$R_D/2a$		t_D, мс	
		теор.	эксп.	теор.	эксп.
$2H_2+O_2$	25 (0,8)	45	38	1,4	1,2
H_2+2O_2	15 (0,9)	86	92	9,5	8,3
$4H_2+O_2$	30 (0,8)	54	79	5,9	3,1
H_2+O_2	30 (0,9)	44	41	1,6	1,8
CH_4+2O_2	20 (0,9)	57	56	2,1	2,1
C_2H_2+воздух	22 (0,9)	67	92	5,7	6,1
$2CO+O_2$	40 (0,9)	39,6	37,5	3,8	3,0

Эволюция распределения давления и скорости для смеси H_2+2O_2 приведена на рис. 1–3, для смеси CH_4+2O_2 – на рис. 4–6. Центру симметрии соответствует $x=0$. На остальных рисунках индексы у символов указывают на приведенные в подрисуночных подписях моменты времени.

При сверхзвуковой скорости движения турбулентного пламени в его области расположения наблюдаются быстрые пространственные изменения всех физических параметров (рис. 1, *б*), характеризующих горение. Так как значение приведенной скорости химической реакции Φ(C) практически целиком определяется турбулентной составляющей, то положение максимумов на профиле скорости u совпадает с максимумами Φ(C). Окрестности точек максимумов функции Φ(C) можно считать, как и в классической теории ламинарного горения, областями локализации турбулентного пламени. Они характеризуются высокой температурой и быстрым изменением концентрации исходного продукта. На рис. 1, *б*, видны два следующих друг за другом турбулентных пламени. Такая двойственность объясняется тем, что за первым фронтом турбулентного пламени формируется волна разрежения, где скорость газа (как и давление и плотность) быстро падает. Это влечет за собой снижение скорости химической реакции Φ(C). В результате исходная смесь не успевает сгореть. Во втором фронте пламени снова активизируется скорость горения, что вновь сопровождается интенсификацией горения, ростом давления, скорости и плотности газа.

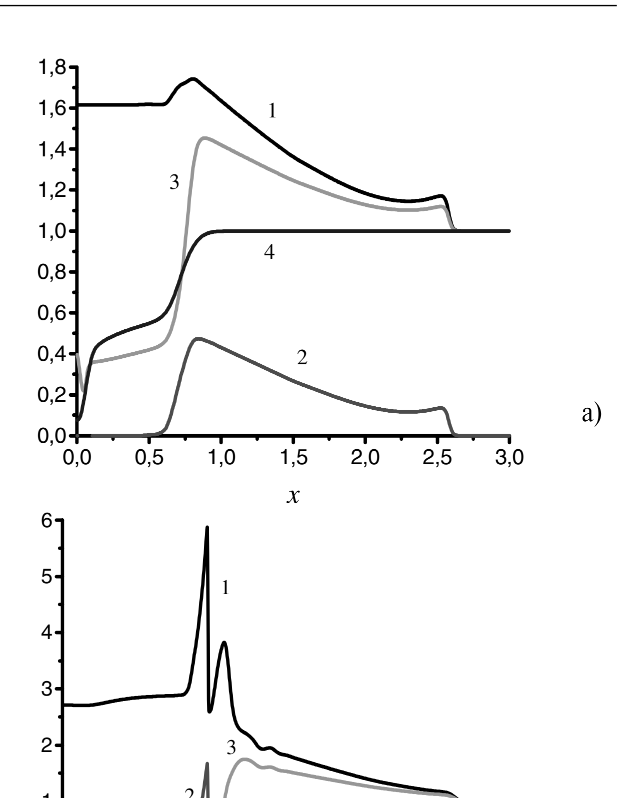


Рис. 1. *Стадия ускорения фронта пламени в смеси H_2+2O_2 для t: а) 7,2, б) 9,0 мс: 1 – p, 2 – u, 3 – ρ, 4 – C*

Скорость движения второго фронта турбулентного горения превышает скорость первого. Это обусловлено тем, что на процессы горения, согласно принятой здесь модели, существенным образом сказывается влияние газодинамических факторов. Скорости движения фронтов горения зависят от характера эволюции (следующих друг за другом) ударных волн, которые сами же их генерируют.

Если скорость пламени меньше скорости звука в исходной смеси, то пространственное распределение газодинамических параметров и концентрации C гладкое, без ярко выраженных изломов (рис. 1, *а*). Здесь максимальная скорость газа составляет несколько десятков м/с, а скорость турбулентного пламени относительно газа немногим превышает скорость ламинарного горения u_n.

На рис. 1, *а*, отчетливо видна в точке $x \approx 2,6$ слабая волна сжатия впереди фронта пламени, наличие которой обусловлено начальными данными (6).

На рис. 2 приведены этапы формирования детонационного режима горения. Вторая волна турбулентного горения здесь уже догнала переднюю волну, в результате чего образовалась одна область турбулентного горения с более высокой скоростью химической реакции, большими скачками газодинамических параметров, чем первые две. После такого слияния волн турбулентного горения переход медленного горения в детонацию еще больше ускоряется.

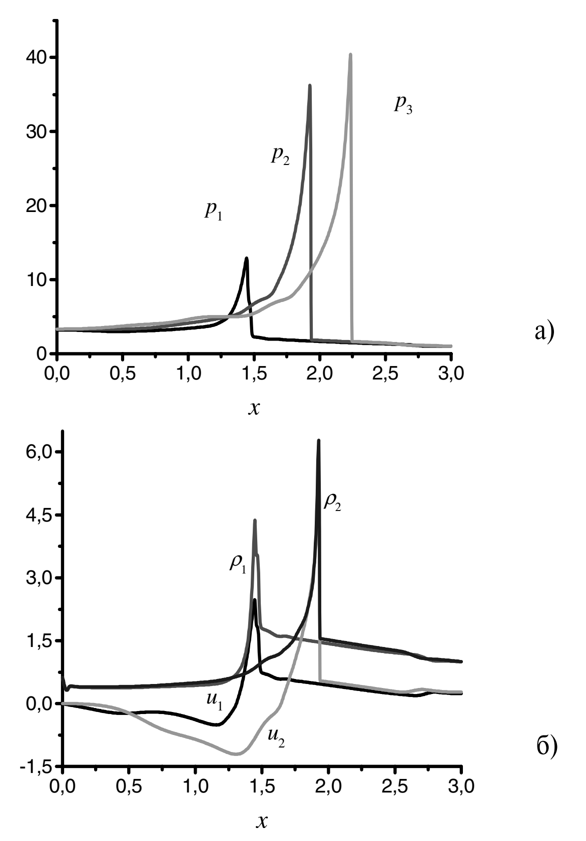


Рис. 2. *Возникновение детонационной волны в смеси H_2+2O_2 для t: 1) 9,4, 2) 9,7, 3) 9,9 мс*

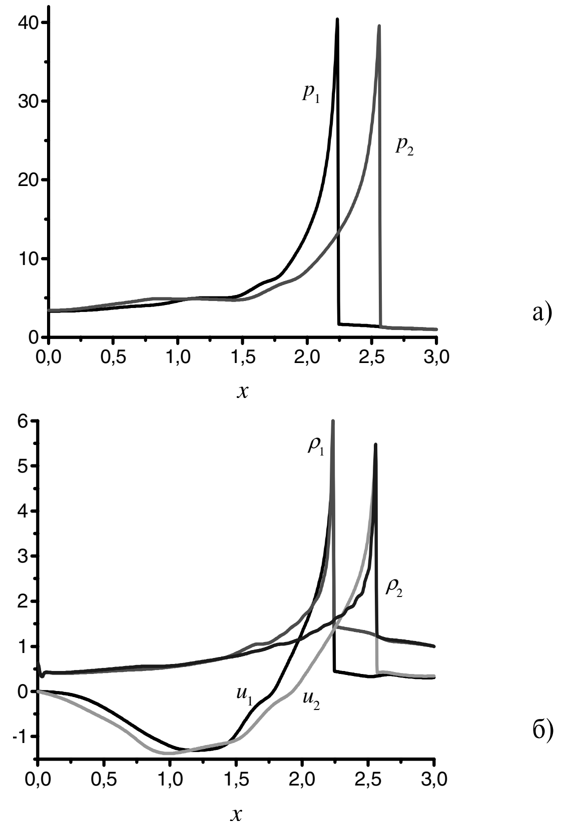


Рис. 3. *Переход пересжатой детонационной волны в стационарную в смеси H_2+2O_2*

Волнообразный вид распределений давления, скорости и плотности за фронтом пламени вызван блуждающими возмущениями, возникшими при догорании остатков свежей смеси, и частично – при слиянии двух первоначальных фронтов турбулентного горения. Эти волны, взаимодействуя с ударной волной и «стенкой» (с центром симметрии), с течением времени исчезают. На достаточно больших временах, когда завершено формирование стационарной детонационной волны, а последняя значительно удалена от стенки, блуждающие волны практически не наблюдаются. Максимум давления находится всегда немного впереди пламени. Положение последней определяется по максимуму скорости химической реакции. Образовавшаяся впоследствии пересжатая детонационная волна (рис. 3) выходит с течением времени (с точностью до ошибок аппроксимации) к режиму, соответствующему на детонационной адиабате точке Чепмена-Жуге. Экспериментальное значение скорости детонационной волны в смеси H_2+2O_2≈1927 м/с. Расчетная же скорость в используемой модели – 1857 м/с. Также несколько заниженной оказалось отношение плотности газа в ударной волне $\rho_{ув}$ к ρ_0: 5,6 вместо 6,0.

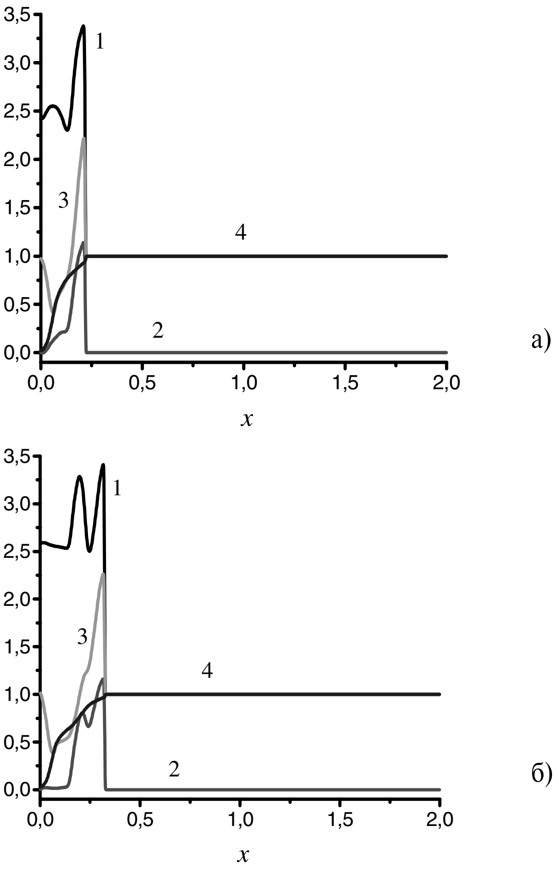


Рис. 4. *Ускорение слабо турбулентного пламени в смеси CH_4+2O_2 для t: а) 0,79, б) 1,18 мс; 1 – p, 2 – u, 3 – ρ, 4 – C*

Качественная картина развития процесса перехода медленного горения в детонацию для смеси CH_4+2O_2, не отличается от той, что имеет место для смеси H_2+2O_2. Здесь тоже могут наблюдаться два фронта (волны) турбулентного горения (рис. 4, 5).

На рис. 4 показано последовательное развитие второго фронта, который движется и усиливается быстрее первого. В нем скорость турбулентного горения пока еще относительно низка. Если пик давления в первой волне за время от 0,79 (*а*) до 1,18 (*б*) мс увеличился всего на ед. %, то во второй волне давление возросло примерно в 1,4 раза от первоначального значения. Эволюционное развитие второго фронта турбулентного горения идет столь быстро, что через еще 0,24 мс (рис. 5, *а*) амплитуда давления в нем становится в 1,68 раза больше амплитуды давления в первом фронте горения.

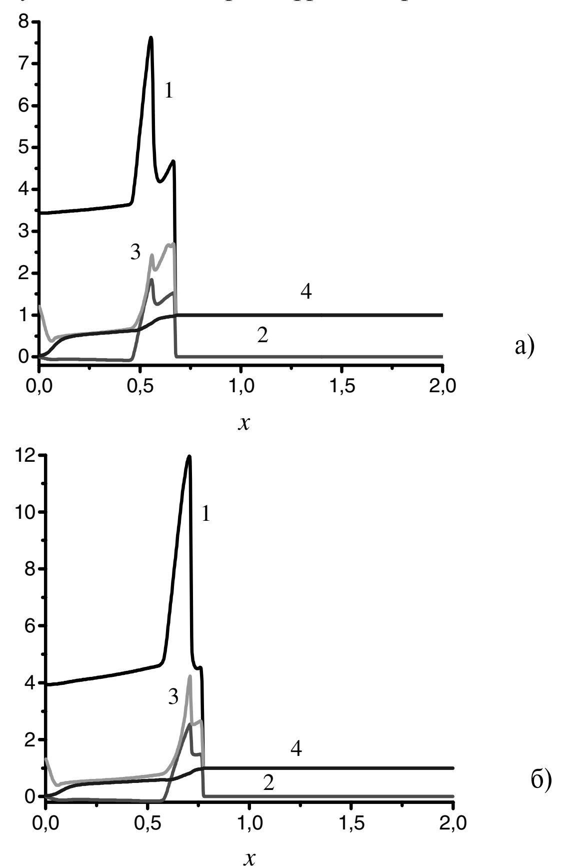


Рис. 5. *Фронт турбулентного пламени с двумя очагами горения в смеси CH_4+2O_2 для t: а) 1,42, б) 1,71 мс; 1 – p, 2 – u, 3 – ρ, 4 – C*

Также сильно различаются и скорости движения указанных волн турбулентного горения. Скорость первой волны меняется со временем слабо, на рис. 4, 5 она ≈1100 м/с. Скорость движения второй волны быстро растет: если в интервале времени на рис. 4 она имеет среднюю скорость ≈300 м/с, то в промежутке от 1,18 (рис. 4) до 1,58 мс (рис. 5) составляет ≈2000 м/с.

Несмотря на незначительное отличие этой величины от скорости стационарной детонационной волны 2146 м/с пики давления и плотности в ударной волне впереди фронта пламени (рис. 5) в 1,5 и более раз ниже, чем при детонационном горении. Слияние двух волн турбулентного горения в одно целое происходит ко времени 1,86 мс. В этот момент область максимального давления не имеет остроконечного пика (рис. 6, *а*), как при других временах.

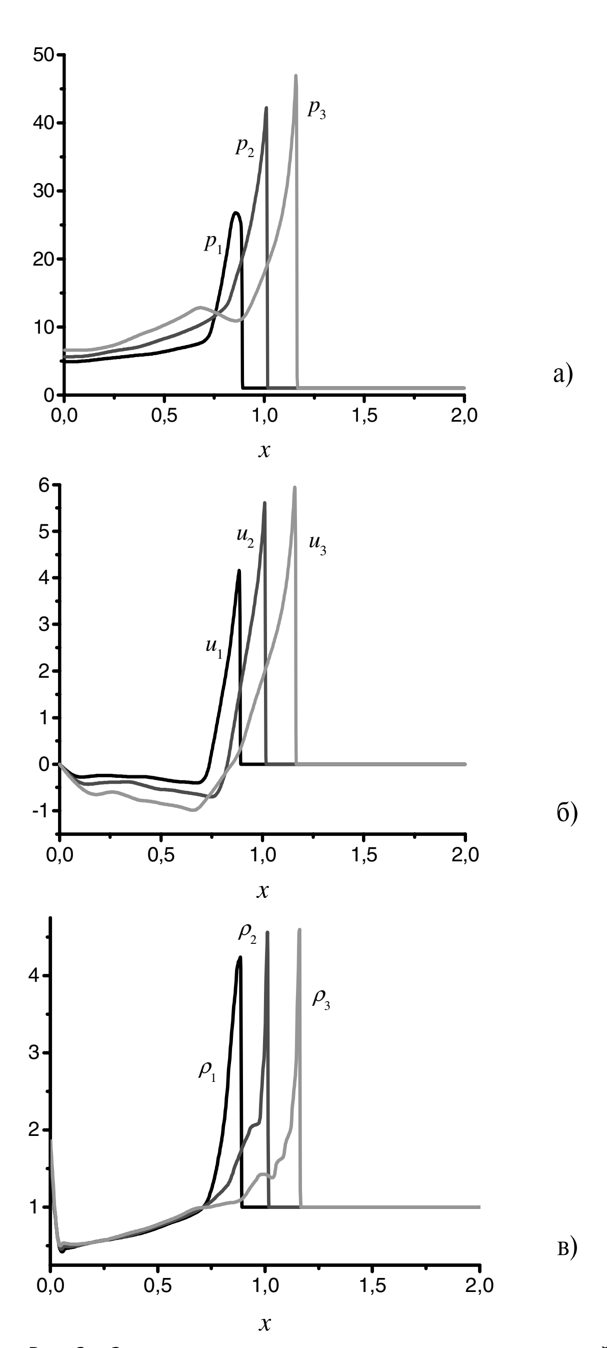


Рис. 6. *Завершающая стадия возникновения детонационной волны в смеси CH_4+2O_2 для t: 1) 1,86, 2) 1,97, 3) 2,1 мс*

В смеси CH_4+2O_2 наблюдается переход медленного горения к стационарной детонационной волне через пересжатое состояние. Переход из пересжатой в обычную детонационную волну происходит с отрывом от фронта детонации небольшого возмущения. Это возмущение, слабо заметное на рис. 3, легко обнаруживается на рис. 6, *а*, как выпуклость на профиле давления позади детонационного пика. Оно распространяется в противоположную сторону по отношению к направлению движения детонационной волны. Ретонационная волна, возникающая в смеси $4H_2+O_2$, имеет ярко выраженную форму ударной волны (рис. 7). При проведении расчетов для этой смеси обнаружено, что ам-

плитуда ретонационной волны растет по мере увеличения амплитуды ударной волны, идущей впереди ускоряющегося фронта турбулентного пламени.

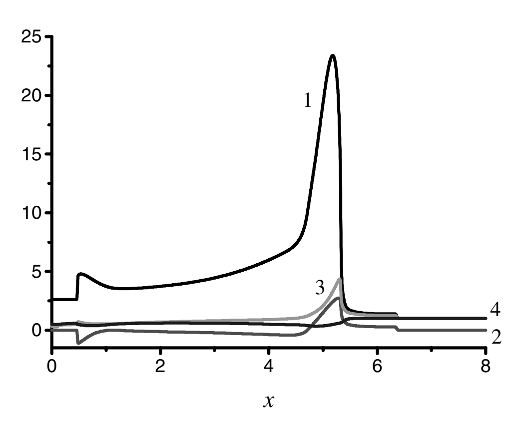


Рис. 7. *Ретонационная волна (x = 0,5) и волна начального возмущения (x = 6,4) в смеси $4H_2+O_2$. 1 – p, 2 – u, 3 – ρ, 4 – C*

Физическая природа появления обратной волны заключается в необходимости «уноса» некоторого избытка энергии из пересжатой детонационной волны для того, чтобы последняя могла выйти к состоянию стационарной детонационной волны. Отрицательное направление движения волны возмущения, которую называют ретонационной волной [8, 10], следует из закона сохранения импульса.

Выводы

- Уравнения газовой динамики горения газовых смесей допускают формулировку на основе исходных понятий «поверхность горения» и «нормальная скорость» распространения пламени.
- В такой формулировке уравнений газовой динамики горения при моделировании турбулентного пламени отсутствует проблема замыканий уравнений типа Фридмана-Келлера, но возникает другая – проблема нахождения численных значений меры Хаусдорфа и фрактальной размерности поверхности горения.
- Разработанная теория дает корректную физическую картину перехода медленного горения в детонацию, а рассчитанные для газовых смесей теоретическое время и протяженность преддетонационного участка удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными. Также согласие теоретических результатов с экспериментом имеет место по возникновению пересжатой детонационной и ретонационной волн.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Сабденов К.О. Теория спонтанной детонации в газах. Ч. 1. Формулировка основных положений // Известия Томского политехнического университета. – 2005. – Т. 308. – № 3. – С. 16–22.
2. Сабденов К.О., Миньков Л.Л. К фрактальной теории перехода медленного горения в детонацию в газах // Физика горения и взрыва. – 1998. – Т. 34. – № 1. – С. 70–78.
3. Зельдович Я.Б. К теории возникновения детонации в газах // Журнал технической физики. – 1947. – Т. 17. – № 3. – С. 3–26.
4. Нетлетон М. Детонация в газах. – М.: Мир, 1989. – 280 с.
5. Сабденов К.О. Нестационарные задачи горения газовых смесей, жидких и твердых взрывчатых веществ и ракетных топлив: Дис. ... канд. физ.-мат. наук. – Томск, 1999. – 115 с.
6. Зельдович Я.Б., Баренблатт Г.И., Либрович В.Б., Махвиладзе Г.М. Математическая теория горения и взрыва. – М.: Наука, 1980. – 478 с.
7. Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа. – М.: Наука, 1987. – 840 с.
8. Бартльме Ф. Газодинамика горения. – М.: Энергоиздат, 1981. – 312 с.
9. Щелкин К.И. К теории возникновения детонации в газовых смесях в трубах // Доклады АН СССР. – 1939. – Т. 23. – № 3. – С. 636–640.
10. Льюис Б., Эльбе Г. Горение, пламя и взрывы в газах. – М.: Мир, 1968. – 592 с.